

06.75.21

CNEA AC 28/75

COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA
DEPENDIENTE DE LA PRESIDENCIA DE LA NACION

CENTRAL NUCLEAR EN ATUCHA
DEPARTAMENTO DE SEGURIDAD Y RADIOPROTECCION

MEZCLAS DE D_2O - H_2O EN EQUILIBRIO

Eduardo Díaz

Buenos Aires-Argentina

1975

Si se mezcla H_2O y D_2O se establece la siguiente reacción



es decir a una determinada temperatura coexistirán las tres formas H_2O , D_2O y HDO . Las fracciones molares de cada una de ellas están relacionadas por la constante de equilibrio K (función de la temperatura).

$$K = \frac{[HDO]^2}{[H_2O] \cdot [D_2O]} \quad 2)$$

Los valores de K se dan en la tabla I.

Interesa conocer cuando se mezcla una determinada cantidad de H_2O y D_2O , que cantidad existirá en equilibrio de las tres especies luego de la mezcla.

Si se mezclan 1 mol de H_2O con a moles de D_2O , se formarán $2x$ moles de HDO , quedando $(1-x)$ moles de H_2O y $(a-x)$ moles de D_2O . La ecuación 2) puede escribirse en este caso:

$$K = \frac{(2x)^2}{(1-x)(a-x)} \quad 3)$$

$$K(1-x)(a-x) = 4x^2$$

$$x^2(4-K) + x(K+Ka) - Ka = 0$$

$$x^2 + \frac{x(K+Ka)}{4-K} - \frac{Ka}{4-K} = 0$$

resolviendo la ecuación de segundo grado:

$$x = \frac{-\frac{K+Ka}{4-K} \pm \sqrt{\frac{K^2(1+a)^2}{(4-K)^2} + \frac{4Ka}{4-K}}}{2}$$

$$x = \frac{-(K + Ka) \pm \sqrt{K^2 (1 + a)^2 + 4 Ka (4 - K)}}{2 (4 - K)}$$

$$2x = \frac{-K (1 + a) \pm K \sqrt{(1 + a)^2 + 4 a \frac{(4 - K)}{K}}}{4 - K}$$

$$2x = \frac{K}{K-4} \left[(1 + a) \pm \sqrt{(1 + a)^2 - \frac{4a (K - 4)}{K}} \right]$$

denominando $S = \frac{K - 4}{K}$

$$2x = \frac{(1 + a) \pm \sqrt{(1 + a)^2 - 4aS}}{S}$$

4)

La 4) da la cantidad de moles de HDO en función de la cantidad reaccionante a moles de D₂O (y 1 mol de H₂O).

Puede demostrarse que la solución compatible es la de signo negativo en la raíz.

En la tabla II se calculan las cantidades en moles de HDO, D₂O y H₂O luego de la mezcla. Se calculan los porcentajes molares de cada sustancia (% molar real) y se los compara con el % molar de D₂O antes de la mezcla, denominado frecuentemente % molar nominal. En la figura 1 se muestran los % molares reales en función del % molar de D₂O nominal.

Como conclusión puede verse que para valores elevados de contenido de D₂O prácticamente existen dos sustancias: HDO y D₂O, es decir el hidrógeno liviano existe prácticamente como HDO y no como H₂O. Para bajas concentraciones de D₂O, el deuterio existe como HDO² y muy poco como D₂O.

TABLA I

VALORES DE K EN FUNCION DE LA TEMPERATURA (1)

T	K
°C	-
0	3.76
25	3.80
50	3.83
75	3.85
100	3.87
125	3.89

(1) KIRSHENBAUM I, "PHYSICAL PROPERTIES AND ANALYSIS OF
HEAVY WATER", Mc GRAW HILL BOOK 1951.

TABLA II

Cantidades a Mezclar			Productos de la Mezcla					
H ₂ O [mol]	D ₂ O [mol]	D ₂ O nominal [% mol]	H ₂ O [mol]	D ₂ O [mol]	HDO [mol]	H ₂ O [% mol]	D ₂ O [% mol]	HDO [% mol]
1,00	0,10	9,09	0,909	0,0095	0,181	82,63	0,86	16,45
1,00	0,48	32,43	0,678	0,1585	0,643	45,81	10,70	43,44
1,00	1,00	50,00	0,500	0,500	1,00	25,00	25,00	50,00
1,00	2,50	71,42	0,291	1,7915	1,417	8,31	51,18	40,48
1,00	5,00	83,33	0,171	4,1715	1,657	2,85	69,52	27,61
1,00	10,00	90,90	0,094	9,094	1,812	0,85	82,67	16,47

$$K = 3,85 \quad S = \frac{K - 4}{K} = \frac{3,85 - 4}{3,85} = -0,0389$$